

Transport diffusif d'un gaz d'électrons confiné dans une nanostructure

Nicolas VAUCHELET, MIP, Université Paul Sabatier

Mots-clés : équation de Schrödinger, équation de Poisson, équation de dérive-diffusion, méthode des sous-bandes, entropie relative, méthode éléments finis, nanotransistor

Dans cette étude, nous présentons l'analyse mathématique et numérique d'un système couplé quantique-classique modélisant le transport d'électrons dans des nanostructures. Un gaz d'électrons est confiné dans une direction $z \in (0, 1)$ dans laquelle le gaz a un caractère quantique, et est transporté dans les deux autres directions spatiales notés $x \in \omega$, où son comportement est classique.

Du à son faible cout numérique, l'équation de dérive-diffusion est largement utilisé pour décrire le transport des particules chargées. Il s'agit d'une équation de conservation de la densité de particule N_s :

$$\partial_t N_s(t, x) - \operatorname{div}_x(\nabla_x N_s(t, x) + N_s(t, x) \nabla_s U_s(t, x)) = 0. \quad (1)$$

L'énergie U_s est l'énergie autoconsistante prenant en compte le confinement des électrons dans la direction z . Cette équation peut être obtenue par une limite diffusive de l'équation de Boltzmann des semiconducteurs.

Le confinement dans la direction z est décrit par la méthode de décomposition en sous-bande [2]. Le comportement des électrons est régit par l'équation de Schrödinger 1D : χ_k sont les vecteurs propres et ϵ_k les valeurs propres de l'opérateur de Schrödinger

$$-\frac{1}{2} \partial_{zz} \chi_k + V \chi_k = \epsilon_k \chi_k \quad (k \geq 1), \quad (2)$$

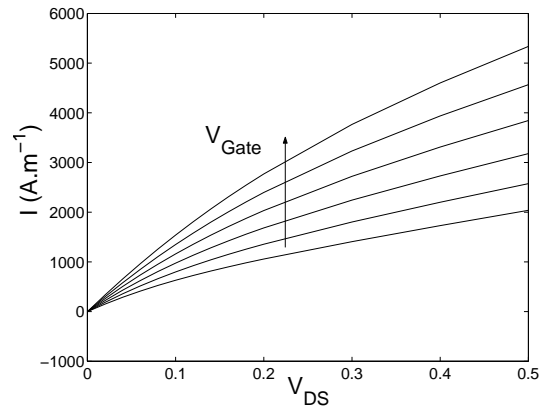
On impose des conditions de Dirichlet aux bords $\chi_k(t, x, \cdot) \in H_0^1(0, 1)$ et $\int_0^1 \chi_k \chi_\ell dz = \delta_{k\ell}$. Le potentiel électrostatique V est obtenu par l'équation de Poisson

$$-\operatorname{div}_{x,z}(\nabla_{x,z} V) = N, \quad \text{avec} \quad N = N_s \sum_k \frac{e^{-\epsilon_k}}{\sum_\ell e^{-\epsilon_\ell}} |\chi_k|^2, \quad (3)$$

où N est la densité dans le cas d'une statistique de Boltzmann. Ce système est couplé grâce à l'expression du potentiel autoconsistant : $U_s = -\log \sum_k e^{-\epsilon_k}$.

Une analyse mathématique de ce système reposant sur des techniques d'entropie [1] a permis de montrer l'existence et l'unicité de solutions. De plus, pour des conditions aux bords à l'équilibre thermodynamique, la solution converge en temps long exponentiellement vite vers l'équilibre.

Dans le but d'avoir une description qualitative du transport des charges, une simulation numérique du modèle présenté a été effectuée pour un nanotransistor de type Double-Gate-MOSFET [3]. La caractéristique ci-contre représente l'évolution du courant en fonction du potentiel drain-source pour différents potentiels de gate.



Références

- [1] N. BEN ABDALLAH, F. MÉHATS, N. VAUCHELET, *Diffusive transport of partially quantized particles*, à paraître dans Proc. Edinb. Math. Soc.
- [2] E. POLIZZI, N. BEN ABDALLAH, *subband decomposition approach for the simulation of quantum electron transport in nanostructure*, J. Comput. Phys. **202**, 150 (2005).
- [3] P. PIETRA, N. VAUCHELET, en préparation.

Nicolas VAUCHELET – vauchel@mip.ups-tlse.fr
MIP, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse